# 熱方程式の数値シミュレーション

簑毛　崇章

2014 年 11 月 30 日

## 1　熱方程式の導出

長さ $L$ の細長い針金を考える. 断面積が十分小さければ熱の拡散は 1 次元として考えることができる. 区間 $[0,L]$ 上の任意の位置 $x$, 時刻 $t$ における温度を $u(t,x)$ [K] とする. 針金の密度を $\rho(x)$ $[\mathrm{kg}\cdot\mathrm{m}^{-3}]$, 比熱を $c(x)$ $[\mathrm{J}\cdot\mathrm{kg}^{-1}\cdot\mathrm{K}^{-1}]$, 熱伝導係数を $k(x)$ とする. また, 位置 $x$, 時刻 $t$ における単位時間に単位面積を横切る熱量 (熱流束) を $J(t,x)$ $[\mathrm{J}\cdot\mathrm{s}^{-1}\cdot\mathrm{m}^{-2}]$ とする. 熱方程式は次のフーリエの法則により導かれる.

**フーリエの法則**

熱流束はその位置 $x$ での温度勾配に比例する.

$$J(t,x) \propto \frac{\partial u}{\partial x}(t,x)$$

すなわち, 比例係数が熱伝導率であり,

$$J(t,x) = -k(x)\frac{\partial u}{\partial x}(t,x)$$

が成立する. $k$ の単位は $[\mathrm{J}\cdot\mathrm{s}^{-1}\cdot\mathrm{m}^{-1}\cdot\mathrm{K}^{-1}]$

ここで, $(0,L)$ 内の任意の区間 $(a,b)$ での熱総量 $Q$ [J] を考えると

$$Q(t) = \int_a^b c(x)\rho(x)u(t,x)dx$$

となる. このとき単位時間当たりの熱総量の変化は ($u(t,x)$ は $t$ で偏微分可能で十分滑らかとする)

$$\begin{aligned}\frac{dQ}{dt}(t) &= \frac{d}{dt}\int_a^b c(x)\rho(x)u(t,x)dx \\ &= \int_a^b c(x)\rho(x)\frac{\partial u}{\partial t}(t,x)dx \end{aligned} \tag{1}$$

となる. ここで, 区間 $(a,b)$ について $x=a$ での熱の流出は

$$k(a)\frac{\partial u}{\partial x}(t,a)$$

であり, $x=b$ における熱の流入は

$$k(b)\frac{\partial u}{\partial x}(t,b)$$

である. 熱の単位時間当たりの出入りは総熱量の時間変化に等しいので,

$$\begin{aligned}\frac{dQ}{dt}(t) &= k(b)\frac{\partial u}{\partial x}(t,b) - k(a)\frac{\partial u}{\partial x}(t,a)\\ &= \int_a^b \frac{\partial}{\partial x}\left(k(x)\frac{\partial u}{\partial x}(t,x)\right)dx \qquad (2)\end{aligned}$$

式 (1),(2) より

$$\int_a^b c(x)\rho(x)\frac{\partial u}{\partial t}(t,x)dx = \int_a^b \frac{\partial}{\partial x}\left(k(x)\frac{\partial u}{\partial x}(t,x)\right)dx$$

これは、任意の区間 $(a,b) \subseteq (0,L)$ に対して成立するので

$$c(x)\rho(x)\frac{\partial u}{\partial t}(t,x) = \frac{\partial}{\partial x}\left(k(x)\frac{\partial u}{\partial x}(t,x)\right)$$

$\rho(x), c(x), k(x)$ が定数, すなわち $\rho = \rho(x), c = c(x), k = k(x)$ ならば

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t,x) = \frac{k}{c\rho}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t,x)$$

$d = \dfrac{k}{c\rho}$ とおくと $d$ の単位は $[\mathrm{m}^2 \cdot \mathrm{s}]$ となり

$$\frac{\partial u}{\partial t} = d\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

となる. また両辺の次元も等しい. よって 1 次元の熱方程式が導出された.

# 2　1 次元初期境界値問題

1 次元の熱方程式について考える.

$$\frac{\partial u}{\partial t} = d\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \qquad 0 < x < L,\ t > 0.$$

初期条件

$$u(0,x) = u_0(x)$$

境界条件は以下の 3 つを考える.

### 2.1 Dirichlet 境界条件

$$u(t,0)=\alpha, \qquad u(t,L)=\beta$$

境界での値が固定されている条件である.

### 2.2 Neumann 境界条件

$$\frac{\partial u}{\partial x}(t,0)=\alpha, \qquad \frac{\partial u}{\partial x}(t,L)=\beta$$

境界での熱の流入, 流出が決められている.

### 2.3 周期境界条件

$$u(t,0)=u(t,L), \qquad \frac{\partial u}{\partial x}(t,0)=\frac{\partial u}{\partial x}(t,L)$$

境界の両端が滑らかにつながっている条件である.

## 3 方程式の離散化

ここからは,1 次元の熱方程式の初期境界値問題を数値的に解く方法を考察する. コンピュータでは連続量は扱えないので離散的に近似する.

### 3.1 差分法

まず, 熱方程式の左辺の $\dfrac{\partial u}{\partial t}$ を離散化する. $u(t+\Delta t,x)$ のテイラー展開を考える.

$$u(t+\Delta t,x)=u(t,x)+\frac{\partial u}{\partial t}(t,x)\cdot\Delta t+\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(t,x)\cdot\Delta t^2+O(\Delta t^3)$$

より

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t,x)=\frac{u(t+\Delta t,x)-u(t,x)}{\Delta t}+O(\Delta t) \tag{3}$$

となり、微分を差分で近似できた (前進差分). 次に $\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t,x)$ の差分化したものを求める.

$$u(t,x+\Delta x)=u(t,x)+\frac{\partial u}{\partial x}(t,x)\cdot\Delta x+\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t,x)\cdot\frac{\Delta x^2}{2!}+\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}(t,x)\cdot\frac{\Delta x^3}{3!}+O(\Delta x^4) \tag{4}$$

$$u(t,x-\Delta x)=u(t,x)-\frac{\partial u}{\partial x}(t,x)\cdot\Delta x+\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t,x)\cdot\frac{\Delta x^2}{2!}-\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}(t,x)\cdot\frac{\Delta x^3}{3!}+O(\Delta x^4) \tag{5}$$

式 (4),(5) を足して

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t,x)=\frac{u(t,x+\Delta x)-2u(t,x)+u(t,x-\Delta x)}{\Delta x^2}+O(\Delta x^2) \tag{6}$$

よって, $\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t,x)$ を差分化した式が得られた.

## 3.2 熱方程式の差分化

熱方程式を差分化する. 式 (3),(6) から直ちに

$$\frac{u(t+\Delta t,x)-u(t,x)}{\Delta t}=d\frac{u(t,x+\Delta x)-2u(t,x)+u(t,x-\Delta x)}{\Delta x^2}+O(\Delta t,\Delta x^2) \tag{7}$$

を得る. ここで区間 $[0,L]$ を $N-1$ 等分する、すなわち区間 $[0,L]$ を $N$ 個の点で代表し離散化する. 時間も適当な自然数で何等分かする. すなわち $\Delta x=\frac{L}{N-1}$, $x_i=i\times\Delta x$ $(i=0,1,\cdots,N-1)$, $t_n=n\times\Delta t$ . ここで $u_i^n=u(x_i,t_n)$ とおくと (7) から導かれる差分方程式は

$$\frac{u_i^{n+1}-u_i^n}{\Delta t}=\frac{u_{i+1}^n-2u_i^n+u_{i-1}^n}{\Delta x^2} \tag{8}$$

となる。

## 3.3 境界条件の離散化

### 3.3.1 Dirichlet 境界条件

$$u_0^n=\alpha,\qquad u_{N-1}^n=\beta$$

### 3.3.2 Neumann 境界条件

仮想的に $i=-1,N$ の点を設定し、中心差分を考えることにより,

$$u_{-1}^n=u_1^n-2\Delta x\alpha,\qquad u_N^n=u_{N-2}^n-2\Delta x\beta \tag{9}$$

#### 3.3.3 周期境界条件

$$u_0^n = u_{N-1}^n, \qquad u_{-1}^n = u_{N-2}^n \tag{10}$$

# 4 陽解法

式 (8) から $r = \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$ とおいて整理すると

$$u_i^{n+1} = dru_{i+1}^n + (1-2dr)u_i^n + dtu_{i-1}^n \tag{11}$$

これが陽解法の公式である. 初期条件を与えれば右辺が既知となり左辺が直ちに求まる.

## 4.1 陽解法の安定性条件

波数 $k$ の正弦波成分の成長を見るために

$$u_j^n = \lambda^n \exp(ikx_j) \tag{12}$$

とおく. もしある波数 $k$ に対して,$|\lambda| > 1$ ならば波数 $k$ の成分が指数的に成長して, 数値計算において不安定になる. ゆえに任意の波数 $k$ に対して $|\lambda| \leq 1$ でなければならない.
(12) 式を (11) 式に代入して計算する.

$$\begin{aligned}
\lambda^{n+1}\exp(ikx_j) &= dr\lambda^n \exp(ikx_{j+1}) + (1-2dr)\lambda^n \exp(ikx_j) + dr\lambda^n \exp(ikx_{j-1}) \\
\lambda &= dr\exp(ik\Delta x) + (1-2dr) + dr\exp(-ik\Delta x) \\
&= 1 - 2dr(1-\cos k\Delta x) \\
&= 1 - 4dr\sin^2\frac{k\Delta x}{2}
\end{aligned}$$

よって $\lambda \leq 1$ は常に成立するので $\lambda \geq -1$ を調べる.

$$1 - 4dr\sin^2\frac{k\Delta x}{2} \geq -1$$

これが任意の波数 $k$ について成立しなければならないので

$$\begin{aligned}
1 - 4dr &\geq -1 \\
dr &\leq \frac{1}{2}
\end{aligned}$$

したがって

$$d\frac{\Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2}$$

これが陽解法の安定性条件である.

# 5　陰解法

$\dfrac{\partial u}{\partial t}$ を差分化するときに, 後退差分をとれば

$$\frac{u_i^n - u_i^{n-1}}{\Delta t} = \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2}$$

$n$ を 1 つ進めて, 整理すると

$$-dru_{i+1}^{n+1} + (1+2dr)u_i^{n+1} - dru_{i-1}^{n+1} = u_i^n \tag{13}$$

これが陰解法の公式である.

## 5.1　陰解法の安定性条件

陽解法のときと同様に (12) 式を (13) 式に代入して安定性を調べる.

$$\begin{aligned}
-dr\lambda^{n+1}\exp(ikx_{j+1}) + (1+2dr)\lambda^{n+1}\exp(ikx_j) - dr\lambda^{n+1}\exp(ikx_{j-1}) &= \lambda^n \exp(ikx_j) \\
\lambda(-dr\exp(ik\Delta x) + (1+2dr) - dr\exp(-ik\Delta x)) &= 1 \\
\lambda(1 + 2dr(1-\cos(k\Delta x))) &= 1
\end{aligned}$$

$$\lambda = \frac{1}{1 + 4dr\sin^2\dfrac{k\Delta x}{2}}$$

したがって任意の波数 $k$ について $|\lambda| \leq 1$ となるので陰解法は無条件安定である.

## 5.2　陰解法の解法

### 5.2.1　Dirichlet 境界条件のとき

$i = 0, i = N-1$ での値は決まっているので $i = 1, \cdots, N-2$ までで (13) を連立して解けばよい. (11) より $i = 1$ のとき

$$-rd\alpha + (1+2dr)u_1^{n+1} - dru_2^{n+1} = u_1^n$$

となり, $i = N-2$ のときは

$$-rdu_{N-3}^{n+1} + (1+2dr)u_{N-2}^{n+1} - dr\beta = u_{N-1}^n$$

となる. $2 \leq i \leq N-3$ のときは,(13) と同じ差分方程式となる. したがって, 計算すべき連立 1 次方程式は次のようになる.

$$\begin{pmatrix} 1+2dr & -dr & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ -dr & 1+2dr & -dr & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & -dr & 1+2dr & -dr & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & & & -dr & 1+2dr & -dr \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & -dr & 1+2dr \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1^{n+1} \\ u_2^{n+1} \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ u_{N-3}^{n+1} \\ u_{N-2}^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_1^n + dr\alpha \\ u_2^n \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ u_{N-3}^n \\ u_{N-2}^n + dr\beta \end{pmatrix}$$

#### 5.2.2 Neumann 境界条件のとき

(13) より $i = 0$ のとき,(9) から

$$\begin{aligned} -drdu_1^{n+1} + (1+2dr)u_0^{n+1} - dr(u_1^{n+1} + 2\Delta x\alpha) = u_0^n \\ \iff -dru_1^{n+1} + \frac{1}{2}(1+2dr)u_0^{n+1} = \frac{1}{2}(u_0^n + 2dr\Delta x\alpha) \end{aligned}$$

$i = N-1$ のとき

$$\begin{aligned} -dr(u_{N-2}^{n+1} + 2\Delta x\beta) + (1+2dr)u_{N-1}^{n+1} - dru_{N-2}^{n+1} = u_{N-1}^n \\ \iff -dru_{N-2}^{n+1} + \frac{1}{2}(1+2dr)u_{N-1}^{n+1} = \frac{1}{2}(u_{N-1}^n + 2dr\Delta x\beta) \end{aligned}$$

ゆえに計算すべき連立 1 次方程式は次のようになる.

$$
\begin{pmatrix}
\frac{1}{2}(1+2dr) & -dr & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\
-dr & 1+2dr & -dr & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\
0 & -dr & 1+2dr & -dr & 0 & \cdots & 0 \\
\vdots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\
\vdots & \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\
\vdots & \vdots & & & -dr & 1+2dr & -dr \\
0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & -dr & \frac{1}{2}(1+2dr)
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
u_0^{n+1} \\ u_1^{n+1} \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ u_{N-2}^{n+1} \\ u_{N-1}^{n+1}
\end{pmatrix}
$$

$$
= \begin{pmatrix}
\frac{1}{2}(u_0^n - 2dr\Delta x\alpha) \\ u_1^n \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ u_{N-2}^n \\ \frac{1}{2}(u_{N-1}^n - 2dr\Delta x\beta)
\end{pmatrix}
$$

#### 5.2.3 周期境界条件のとき

(10) から $u_0^{n+1} = u_{N-1}^{n+1}$ となるので, $u_i^{n+1} \quad (0 \leq i \leq N-2)$ において解けば良い. (10) より, $i=0$ のとき

$$
-dru_{N-2}^{n+1} + (1+2dr)u_0^{n+1} - dru_1^{n+1} = u_0^n
$$

(10) より, $i = N-2$ のとき

$$
-dru_{N-3}^{n+1} + (1+2dr)u_{N-2}^{n+1} - dru_0^{n+1} = u_{N-2}^n
$$

したがって, 計算すべき連立一次方程式は次のようになる.

$$
\begin{pmatrix}
1+2dr & -dr & 0 & \cdots & \cdots & 0 & -rd \\
-dr & 1+2dr & -dr & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\
0 & -dr & 1+2dr & -dr & 0 & \cdots & 0 \\
\vdots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\
\vdots & \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\
0 & \vdots & & & -dr & 1+2dr & -dr \\
-rd & 0 & \cdots & \cdots & 0 & -dr & 1+2dr
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
u_0^{n+1} \\ u_1^{n+1} \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ u_{N-3}^{n+1} \\ u_{N-2}^{n+1}
\end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
u_0^n \\ u_1^n \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ u_{N-3}^n \\ u_{N-2}^n
\end{pmatrix}
$$

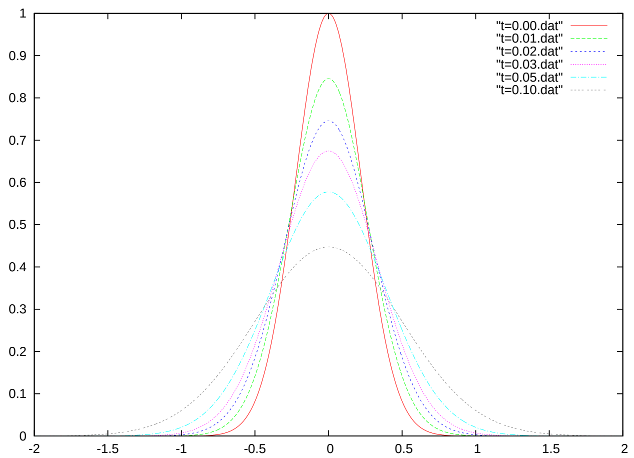
連立一次方程式の計算は LU 分解法等を用いて解けば良い.

## 6　数値計算

熱方程式の初期境界値問題をコンピュータを用いて数値計算する．次の問題を考える．

$$
\begin{cases}
\dfrac{\partial u}{\partial t} = \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad -2 < x < 2,\ t > 0 \\
u(0, x) = e^{-x^2} \\
\dfrac{\partial u}{\partial x}(-2, t) = 0, \qquad \dfrac{\partial u}{\partial x}(2, t) = 0
\end{cases}
$$

陰解法による数値計算の結果は次の図のようになった．




## 参考文献


[1] 戸田盛和,『熱現象 30 講』, 朝倉書店,1995

[2] 高見穎郎, 河村哲也,『偏微分方程式の差分解法』, 東京大学出版会,1994